

CCG 社北米ユーザー会 2024 報告



6月25日から28日の4日間、カナダ・モントリオールで北米ユーザー会が開催されました。今年は、CCG 社設立 30 周年という節目の年であり、毎年参加されているユーザーから MOE を使い始めたばかりの方まで、150 名を超える参加者が集まり、大変盛況な会となりました。2 日目の昼までは、主に MOE の初心者を対象にした操作習得のワークショップが行われ、その後、メインイベントであるプレゼンテーションのセッションとして、20 件の口頭発表が行われました。また、2 日目の夜にはポスターセッションが開催され、その他にもモントリオール市内のツアーやディナークルーズなど、参加者同士の交流を深めるイベントもありました。

■ワークショップ

ワークショップでは 9 つのコースが用意されており、各コース 25 名程度の参加者がそれぞれの興味に合わせてコースを選択し、MOE の操作方法を学びました。なお、各コースの内容は弊社が提供しているトレーニングコースと同一です。

■ポスターセッション

Poster Session では軽食が提供され、食事を片手に熱い議論が交わされました。計 26 演題のうち 7 演題が CCG 社によるもので、低分子・ペプチド・抗体・核酸などさまざまな創薬モダリティに対して MOE を活用した研究が発表されました。CCG 社による演題のいくつかを以下に紹介します。

- Conformational Analysis of Nucleic Acids for Optimizing DNA and RNA Topological Models
- Constrained Peptide Modeling, Conformational Analysis and Property Predictions
- Structure-Based Charge Calculations for Predicting Properties and Profiling Antibody Therapeutics
- Targeted Protein Degradation with Heterobifunctional Degraders: Modeling and Screening

■プレゼンテーション

プレゼンテーションは 3 日間に分けて行われ、力場開発などの分子シミュレーションに関するものから、低分子創薬や生物製剤に関するものまで、さまざまなテーマの研究が発表されました。参加者からの質問も多く、活発な議論が交わされました。いくつかの演題を以下に紹介します。

- Advancing Force Field Design and Development at Open Force Field

Open Force Field Initiative
Lily Wang

- AmberEHT Forcefield: Novel Approaches to Small Molecule Parameterization

Chemical Computing Group
Paul Labute

- A Pharmacophore-Based Virtual Screening Method for Identifying Potential Antibody: Antigen Binding Partners

Moderna Inc.
Sandeep Kumar

- Understanding the Chameleonicity and Permeability of PROTACs Using Molecular Dynamics Simulations, Markov Models, and Deep Learning

Johnson & Johnson Innovative Medicine
Bryn Taylor

CCG 社北米ユーザー会 2024 の詳細は、以下の CCG 社ウェブページよりご覧いただけます。

https://www.chemcomp.com/en/UGM-2024-North_America.htm

また、CCG 社の発表資料についてはご提供可能ですので、ご希望の方は弊社までお問い合わせください。



図 1. CCG 社北米ユーザー会 2024 の開催ポスター

- 弊社ウェブサイトには、取り扱い製品、最新のニュース、お客様向けサポート情報、他のサイトへのリンクなどを掲載しております。
- 電子媒体でのニュースレターおよびバックナンバーは、弊社ニュースレターのウェブページ (<https://dxecatalog.wisebook.jp/apps/home/MOLSIS>) をご覧ください。
- ニュースレター発行のご案内が必要な方は下記 URL にて Newsletter 購読の登録をお願いします。
<https://molsis.powerappsportals.com/ja-JP/Contact/CustomerRegistration/>
- 記載されている会社名及び商品名は、各社の商標または登録商標です。

MOLSIS ニュースレター

No. 31, 2024.10

2024 年 10 月 1 日 発行

発行所 株式会社モルシス

Copyright © 2024 MOLSIS Inc.



株式会社モルシス

URL: <https://www.molsis.co.jp/>

TEL: 03-3553-8030 FAX: 03-3553-8031 E-mail: sales@molsis.co.jp